

06;12

Энергетическая релаксация при неупругом рассеянии электронов на локализованных состояниях

© В.К. Дугаев, В.Л. Волков, М. Ошвалдовски, М. Виейра

Высшая инженерная школа, Лиссабон, Португалия
Черновицкое отделение Института проблем материаловедения НАН
Украины
Технический Университет, Познань, Польша
E-mail: chimsp@unicom.cv.ua

Поступило в Редакцию 22 марта 2002 г.

Мы предлагаем механизм, который может приводить к фазовой релаксации в поликристаллических полупроводниках и металлах. Этот механизм связан с неупругим рассеянием электронов на локализованных состояниях с энергиями вблизи уровня Ферми.

В последнее время большое число работ посвящено дискуссии относительно возможных механизмов фазовой релаксации в неупорядоченных полупроводниках и металлах [1–4]. Сейчас считается общепризнанным [3,5,6], что неупругое рассеяние на двухуровневых центрах может быть причиной насыщения времени релаксации фазы при $T \rightarrow 0$. Эксперименты на поликристаллических неупорядоченных металлах ясно продемонстрировали, что при низких температурах время фазовой релаксации стремится к насыщению [4]. Аналогичное явление было обнаружено в проведенных недавно экспериментах на тонких поликристаллических пленках сильно легированного свинцом антимонида индия [7,8]. В этих работах была предложена идея неупругого рассеяния в окрестности границ зерен как возможной причины наблюдаемого насыщения времени релаксации.

В данной работе мы представляем оценку времени энергетической релаксации при неупругом взаимодействии свободного электрона с электронами, локализованными на примесных центрах или дефектах. Основное предположение состоит в том, что в окрестности энергии

Ферми свободных электронов существует достаточно плотный дискретный энергетический спектр локализованных электронных состояний.

Мы рассматриваем поликристаллический сильно легированный полупроводник с носителями (для определенности электронами), которые двигаются диффузионно в пределах кристаллитов (длина свободного пробега l значительно меньше характерного размера зерна L_c). Электронный газ считаем вырожденным, и предполагаем, что порог подвижности для электронов в кристаллите расположен ниже уровня Ферми. В этом случае проводимость в пределах кристаллита может быть описана классически с малыми локализационными поправками ($k_F l \gg 1$). Мы также полагаем, что кристаллиты отделены тонкими туннельными барьерами, что позволяет электронам легко двигаться в поликристалле, а межкристаллитное пространство заполнено аморфизированным полупроводником. Таким образом, мы представляем упрощенно материал, заполняющий пространство между кристаллитами, как сильно легированный полупроводник с краем подвижности, расположенным значительно выше уровня Ферми. Основным предположением является то, что электронные состояния с энергиями вблизи уровня Ферми являются локализованными в пространстве между кристаллитами и/или вблизи их поверхности.

Соответственно этому мы рассматриваем модель с энергетическим спектром ϵ_k электронов, заполняющих сферу Ферми, и большим числом локализованных электронных состояний с энергиями ϵ_n вблизи уровня Ферми. Поскольку энергии локализованных состояний расположены в пределах энергетической зоны ϵ_k , они являются резонансными состояниями, гибридными со спектром ϵ_k . Для оценок мы пренебрегаем эффектами гибридизации и рассматриваем состояния с энергиями ϵ_n как локализованные состояния.

Мы полагаем, что подобная модель действительно может быть реализована в окрестности границы раздела кристаллических зерен. Дискретность спектра связана с поверхностными состояниями, появляющимися из-за граничных дефектов или разорванных связей. Известно, что полупроводниковый материал, заполняющий пространство между зернами, проявляет свойства аморфного полупроводника [9] с достаточно широкими зонами дискретных уровней. В нашей модели мы предполагаем, что подобные локализованные состояния существуют вблизи энергии Ферми нелокализованных электронов.

Время энергетической релаксации для электрона с энергией $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ может быть рассчитано с помощью следующей формулы теории возмущений

$$\frac{1}{\tau(\varepsilon_{\mathbf{k}})} = \frac{2\pi}{\hbar} \Omega \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \sum_{i,n,n'} |V_{\mathbf{k}\mathbf{k}',nn'}|^2 [1 - f(\varepsilon_{\mathbf{k}'})] \times f(\varepsilon_n) [1 - f(\varepsilon_{n'})] \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} + \varepsilon_n - \varepsilon_{n'}), \quad (1)$$

где $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}',nn'}$ — матричный элемент электрон-электронного взаимодействия с переходом одного электрона из состояния \mathbf{k} в состояние \mathbf{k}' и другого из состояния n в n' . Суммирование по i означает суммирование по всем локализованным центрам, тогда как n, n' подразумевает состояния на одном и том же центре. Функция распределения Ферми $f(\varepsilon)$ в (1) ограничивает интегрирование и суммирование переходами только из занятых в незанятые состояния, тогда как δ -функция связана с законом сохранения энергии. Мы обозначили через Ω объем кристаллического зерна и будем рассматривать отдельное зерно как кристалл с объемом Ω . Применимость формулы (1) к локализованным или резонансным состояниям ограничена использованием теории возмущений второго порядка по электрон-электронному взаимодействию. Мы ограничиваемся этим приближением в рассматриваемой модели.

Используя волновые функции свободных электронов, нормализованные в объеме Ω , и набор волновых функций, соответствующих электронам, локализованным на i -й примеси, мы можем найти матричные элементы рассеяния $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}',nn'}$. Процесс рассеяния свободного электрона на скалярном потенциале $H_{im}(\mathbf{r}) = e\phi(\mathbf{r})$ может быть записан в виде взаимодействия для гамильтониана в представлении вторичного квантования

$$\int d^3\mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r}) H_{im}(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = \frac{e}{\Omega} \sum_{kq} \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3} c_{\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \phi_{\mathbf{q}}, \quad (2)$$

где $\psi^*(\mathbf{r})$, $\psi(\mathbf{r})$ и $c_{\mathbf{k}}^+$, $c_{\mathbf{k}}$ — операторы рождения и уничтожения делокализованных электронов в координатном и импульсном представлениях соответственно, а $\phi_{\mathbf{q}}$ является Фурье-преобразованием $\phi(\mathbf{r})$.

Переходы между локализованными состояниями n и n' описываются выражением

$$\int d^3\mathbf{r} \psi_l^*(\mathbf{r}) e\phi(\mathbf{r}) \psi_l(\mathbf{r}) = e \sum_{m'} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3} w_{m'}(\mathbf{q}) c_n^+ c_{n'} \phi_{\mathbf{q}}, \quad (3)$$

с матрицей

$$w_{m'}(\mathbf{q}) = \int d^3\mathbf{r} \varphi_n^*(\mathbf{r}) \varphi_{n'}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \quad (4)$$

где $\varphi_n(\mathbf{r})$ является волновой функцией локализованного электрона. Тогда мы можем написать амплитуду процесса с переходами $\mathbf{k}, n \rightarrow \mathbf{k}', n'$ как

$$V_{m',k}(\mathbf{q}) = \frac{e^2}{\Omega} \cdot w_{m'}(-\mathbf{q}) \cdot D(\mathbf{q}), \quad (5)$$

где $D(\mathbf{q}) \equiv \langle \phi_{\mathbf{q}} \phi_{-\mathbf{q}} \rangle = 4\pi/q^2$ — коррелятор электромагнитных флуктуаций [10].

Теперь мы рассчитаем вероятность (4). Пусть a_l — радиус соответствующей локализованной функции. Поскольку передача энергии для электрона вблизи поверхности Ферми порядка $k_B T$, то соответствующая передача импульса $q \propto k_F(k_B/T)/\varepsilon_F$, где ε_F — энергия Ферми делокализованных электронов и k_B — постоянная Больцмана. Это позволяет оценить $qa_l \propto a_l k_F(k_B T)/\varepsilon_F \ll 1$. Таким образом, экспоненту в (4) можно представить в виде степенного ряда по $(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})$ и мы получаем

$$w_{m'}(\mathbf{q}) \approx (qa_l)^2. \quad (6)$$

Здесь мы учитываем то, что первый член в разложении экспоненты может быть опущен из-за ортогональности волновых функций с различными n , а второй член равен нулю после интегрирования в (1) по углам. Используя (5), (6) и вводя плотности состояний ρ, ρ_l для свободных и локализованных электронов, которые постоянны вблизи уровня Ферми, мы получаем оценку для времени релаксации

$$\frac{\hbar}{\tau(\varepsilon)} \propto \varepsilon^2 \rho \rho_l^2 R y^2 a_B^2 a_l^4, \quad (7)$$

где $Ry = me^4/\varepsilon_0 \hbar^2$ и $a_B = \varepsilon_0 \hbar^2/me^2$ являются соответственно эффективным Ридбергом и боровским радиусом. Результат (7) соответствует обычному электрон-электронному рассеянию в металлах [11], для которых время релаксации пропорционально квадрату энергии ε^2 .

Для плотности состояний электронов на уровне Ферми мы имеем $\rho = mk_F/2\pi^2\hbar^3 \propto k_F/(a_B^2 Ry)$. Можно оценить плотность локализованного уровня (связанного только с одним дефектным центром) как $\rho_l \approx 1/\Delta\varepsilon$, где $\Delta\varepsilon \approx \hbar^2/m_0 a_l^2$ является средней разницей между энергиями ближайших локализованных уровней. Отметим, что мы оценили плотность локального уровня, используя эффективную массу электрона m_l , которая отлична от массы свободного электрона в InSb. Причина этого состоит в том, что большинство локальных состояний расположено в областях между зернами аморфного материала с весьма отличными свойствами. В качестве числа локальных центров мы используем выражение $N_l \approx c_l L_d L_c^2$, где c_l — плотность дефектов в пространстве между зернами, L_d — ширина этой области и L_c — размер зерна ($L_c^3 = \Omega$).

Для численных оценок мы используем следующие параметры InSb: $m = 0.014m_0$, $\varepsilon_0 = 16$, которые дают нам $a_B = 6.75 \cdot 10^{-6}$ см и $Ry = 0.003$ eV. Для концентрации свободных носителей мы берем $n = 5 \cdot 10^{16}$ см $^{-3}$, из чего следует $k_F \approx 10^6$ см $^{-1}$. Энергия, отсчитанная от уровня Ферми, равна $\varepsilon \approx k_B T$. Наши оценки других параметров дают $L_c = 10^{-5}$ см, $L_d = 10^{-6}$ см, $a_l = 10^{-6}$ см, $c_l = 10^{22}$ см $^{-3}$, $m_l = 0.2m_0$.

С такими параметрами мы получаем

$$\frac{\hbar}{\tau_\varepsilon} \approx T \cdot 10^3 \frac{T}{Ry}. \quad (8)$$

Таким образом, оказывается, что при $T > 1$ К зависимость времени энергетической релаксации более сильная, чем $\varepsilon \approx k_B T$. Иначе говоря, в том случае, когда электроны неупруго рассеиваются на локальных дефектных центрах границ зерен, они полностью теряют когерентность.

Наблюдаемая фазовая релаксация (в оценках мы полагаем, что время релаксации фазы имеет тот же порядок величины, что и время релаксации по энергии) в поликристаллическом материале с сильно релаксирующими на границах электронами имеет порядок времени диффузии через зерно $\tau_c \approx L_c^2/D_0$, где D_0 — коэффициент диффузии делокализованных электронов. Причина этого состоит в том, что, когда электрон диффундирует через зерно, он не чувствует его границы. В результате наблюдаемое время релаксации фазы не зависит от температуры в большом интервале температур. И только тогда, когда температура становится меньше некоторой критической величины, определяемой условием полной дефазировки на границе, $\hbar/\tau_\varepsilon \approx k_B T$, наблюдаемое время релаксации начинает возрастать.

Таким образом, наши оценки показывают, что рассеяние электронов на локальных состояниях вблизи границ зерен может быть возможной причиной дефазировки электронов, когда они перемещаются через границы зерен. В этом случае наблюдаемое время релаксации фазы в поликристаллическом материале определяется средним размером зерен. В соответствии с предложенной ранее идеей [7,8] это может быть причиной наблюдения эффекта насыщения времени релаксации фазы в поликристаллических пленках InSb при $1\text{ K} < T < 4\text{ K}$. Следует отметить, что представленные расчеты сделаны в рамках упрощенной модели и поэтому носят оценочный характер.

Эта работа выполнена при частичной поддержке через гранты Р.Р. Grant BW 62–184 и INTAS 2000–0476, а также научной стипендии НАТО № СР (UN) 06/B/2001/PO.

Список литературы

- [1] *Mohanty P., Jariwala E.M.Q., Webb R.A.* // Phys. Rev. Lett. 1997. V. 78. N 17. P. 3366–3369.
- [2] *Altshuler B.L., Gershenson M.E., Aleiner I.L.* // Physica E. 1998. V. 3. N 1–3. P. 58–68.
- [3] *Imry Y., Fukuyama H., Schwab P.* // Europhys. Lett. 1999. V. 47. N 5. P. 608–614.
- [4] *Lin J.J., Kao L.Y.* // J. Phys. Cond. Matter. 2001. V. 13. N 5. P. L119–L125.
- [5] *Zawadowski A., von Delft J., Ralph D.C.* // Phys. Rev. Lett. 1999. V. 83. N 13. P. 2632–2635.
- [6] *Aleiner I.L., Altshuler B.L., Galperin Y.M.* // Phys. Rev. B. 2001. V. 63. N 20. 201401. P. 1–4.
- [7] *Oszwaldowski M., Berus T., Dugaev V.K.* // Mol. Phys. Reports. 1998. V. 21. N 1. P. 139–143.
- [8] *Oszwaldowski M., Berus T., Dugaev V.K.* // Ann. Physik. 1999. V. 8. N S1. P. 201–204.
- [9] *Adler D.* // Physical properties of amorphous materials / Ed. by D. Adler, B.B. Schwartz, M.C. Steele. New York: Plenum Press, 1985.
- [10] *Берестецкий В.Б., Луфицкий Е.М., Путаевский Л.П.* Квантовая электродинамика. М.: Наука, 1989. 728 с.
- [11] *Thouless D.J.* // Phys. Rev. Lett. 1977. V. 39. N 18. P. 1167–1169.